

взаимодействий скелетных атомов X-C-X, X-C(X)-X через один атом C и через два атома X-C-C-X, X-C-C-XX, XX-C-C-XX,... XXX-C-C-XXX в структурном изомере этана (см. табл.):

- 1) $a_0 = n_{\text{C-C}} = 1$; 2) $a_1 = n_X^{\text{C-C}} = (k+l)$; 3) $a_3 = n_{\text{XX}}^{\text{C-C}} = 1/2k(k-1) + 1/2l(l-1)$;
- 4) $a_2 = n_{\text{XX}}^{\text{C-C}} = (k \cdot l)$; 5) $a_4 = n_{\text{XXX}}^{\text{C-C}} = 1/6k(k-1)(k-2) + 1/6l(l-1)(l-2)$;
- 6) $a_5 = n_{\text{X-XX}}^{\text{C-C}} = 1/2l(l-1)k + 1/2k(k-1)l$; 8) $a_7 = n_{\text{XX-XX}}^{\text{C-C}} = 1/4k \cdot (k-1) \cdot l \cdot (l-1)$
- 7) $a_6 = n_{\text{X-XXX}}^{\text{C-C}} = 1/6 \cdot k \cdot l \cdot (l-1)(l-2) + 1/6 \cdot k \cdot l \cdot (k-1)(k-2)$ (2)
- 9) $a_8 = n_{\text{XX-XXX}}^{\text{C-C}} = 1/12k \cdot (k-1) \cdot l \cdot (l-1)(l-2) + 1/12 \cdot l \cdot (l-1) \cdot k \cdot (k-1)(k-2)$
- 10) $a_9 = n_{\text{XXX-XXX}}^{\text{C-C}} = 1/36 \cdot k \cdot (k-1)(k-2) \cdot l \cdot (l-1)(l-2)$.

Таблица 1. Расчетная схема оценки свойства P структурных изомеров X-замещенных этана ($X = \text{CH}_3$) в разных приближениях.

Граф X зам. этана	a_0	n		K_3		$K_{\text{т3}}$		K_5		K_6	K_7	2^n
		a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8	a_9		
CH_3CH_3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{X}$	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
CH_3CHX_2	1	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	4
$\text{CH}_2\text{XCH}_2\text{X}$	1	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	4
CH_3CX_3	1	3	3	0	1	0	0	0	0	0	0	8
CH_2XCHX_2	1	3	1	2	0	1	0	0	0	0	0	8
CH_2XCX_3	1	4	3	3	1	3	1	0	0	0	0	16
CHX_2CHX_2	1	4	2	4	0	4	0	1	0	0	0	16
CHX_2CX_3	1	5	4	6	1	9	2	3	1	0	0	32
CX_3CX_3	1	6	6	9	2	18	6	9	6	1	0	64

Схема (5) уже различает структурные изомеры ряда X-замещенных этана.

$$P = n_0 \square_0 + n_1 \square_1 + n_2 \square_2 + \dots + n_9 \square_9, \quad (5)$$

1. Нилов Д.Ю., Смоляков В.М. / Схема оценки свойств структурных X-замещенных этана и коэффициенты бинома Ньютона. // Тез. докл. Всерос. молодеж. конф. «Инновации в химии: достижения и перспективы». Казань. 29-30 сентября 2011. С. 48-51.

ТЕМПЕРАТУРЫ И ТЕПЛОТЫ ПЛАВЛЕНИЯ СОЕДИНЕНИЙ

Ln_2S_3 ($\text{Ln} = \text{Dy}, \text{Y}, \text{Er}$)

Ельшиев А.В., Андреев П.О.

Тюменский государственный университет

625000, г. Тюмень, ул. Семакова, д. 10

Сведений по экспериментально установленным энтальпиям плавления соединений Ln_2S_3 ($\text{Ln} = \text{La} - \text{Lu}, \text{Sc}$) в литературе не обнаружено.

Соединения Ln_2S_3 представляют собой класс синтетических тугоплавких материалов, температуры плавления которых выше температуры плавления железа 1539°C .

Разработанный метод визуально-политермического анализа (ВПТА) позволяет нагревать образцы в атмосфере аргона со скоростью до 500 и даже $1000^\circ\text{C}/\text{мин}$. Считается, что в виду высоких скоростей нагрева образец не успевает термически диссоциировать и поэтому в методе фиксируются объективные данные о температурах плавления фаз. Общепринятым считается, что точность метода составляет величину $\pm 1\%$ от значения температуры в К.

Впервые для изучения использовался комплексный метод синхронного термического анализа (СТА) на приборе STA 449 F3 Jupiter, оснащенный мощным ИТ-комплексом. Методики СТА основаны на сочетании дифференциального термического анализа (ДТА), дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и термогравиметрического анализа (ТГА).

Метод СТА позволяет проводить термический анализ проб образцов до 2000°C в атмосфере гелия. Фиксируется характер изменения пика во времени, температуры проявления пика, площадь пика, которая пропорциональна энтальпии плавления пробы. Сведений о применении метода для изучения соединений Ln_2S_3 в литературе не обнаружено.

Таблица

Данные термического анализа проб образцов соединений Dy_2S_3 , Er_2S_3 , Y_2S_3 .

Характеристики	Состав проб образцов		
	$\gamma\text{-Dy}_2\text{S}_3$	$\delta\text{-Y}_2\text{S}_3$	$\delta\text{-Er}_2\text{S}_3$
Масса пробы, мг	156	144	145
Δm , %	0.2 - 0.3	0.2 - 0.4	0.2 - 0.4
t_1 , °C	1690	1610	1650
t_2 , °C	1726	1665	1686
S , мкВс/мг	-11.03	-10.74	-7.985
$\Delta H_{\text{пл}}$, Дж/г	143	118	103
$\Delta H_{\text{пл}}$, кДж/моль	60	32	44
ВПТА	1750, 1730	1700	1700, 1700, 1670
СТА	1690	1610	1650
Различие в температурах методов ВПТА и СТА	60; 40	90	30; 30; 20

Δm – потеря массы после термического анализа, температура t_1 – начало теплопоглощения, t_2 – окончание теплопоглощения, S – площадь пика.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП «САПОиН» при финансовой поддержке НИР государственного задания (шифр 3.3763. 2011 (7-12)), ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» № 14.В37.21.1184 при финансовой поддержке государства в лице Минобрнауки РФ.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА $\text{Bi}_{26}\text{Mo}_{10}\text{O}_{69}$, ДОПИРОВАННОГО ЭЛЕМЕНТАМИ II А ГРУППЫ

Аришина К.В., Михайловская З.А.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Работа посвящена синтезу, аттестации и установлению структурных особенностей твердых растворов замещения на основе низкосимметричного молибдата висмута $\text{Bi}_{26}\text{Mo}_{10}\text{O}_{69}$, являющегося кислородно-ионным проводником $\text{Bi}_{26}\text{Mo}_{10}\text{O}_{69}$ обладает уникальной колончатой